

| | |
|-------------|---|
| Title | オルソパラ水素混合系における相転移のコンピュータシミュレーション(大阪大学 基礎工学部 物性物理学教室,修士論文アブストラクト 1978年度) |
| Author(s) | 土谷, 茂樹 |
| Citation | 物性研究 (1979), 32(3): 249-249 |
| Issue Date | 1979-06-20 |
| URL | http://hdl.handle.net/2433/89793 |
| Right | |
| Type | Departmental Bulletin Paper |
| Textversion | publisher |

オルソパラ水素混合系における相転移の コンピューターシミュレーション

土 谷 茂 樹

オルソ H_2 (O-H_2), パラ D_2 (P-D_2) は低温では $J=1$ の回転量子数を持ち, 電気四重極モーメントを有する。一方パラ H_2 (P-H_2), オルソ D_2 (O-D_2) の回転量子数は $J=0$ で電気四重極モーメントを持たない。

O-H_2 (P-D_2) 固体はある温度 T_c 以下では F.C.C. 構造をとり, 電気四重極相互作用のため, 分子は 4 つの部分格子内でそれぞれ同一方向 (body diagonal) を向いている (Pa3 構造)。しかし T_c 以上では各部分格子で分子の向きは random になる。この系を P-H_2 (O-D_2) でうすめていくと, これらの分子が電気四重極モーメントを有しないため T_c の降下がおこり, P-H_2 (O-D_2) の濃度がある critical な濃度以下では $T_c=0$ となる。この濃度は F.C.C. 構造の site percolation model における percolation threshold よりもかなり高い。

我々は rigid な F.C.C. 格子に O-H_2 (P-D_2) をある濃度で random に配置し, これらの分子の向きを 4 つの body diagonal だけに限定し, 量子力学的ゆらぎを平均した実際の水素分子の電気四重極相互作用エネルギーをデータとしたモデルを用いた。そしてこれをモンテカルロ法によるコンピューターシミュレーションによって T_c の O-H_2 (P-D_2) 濃度依存性を調べた。

高密度ヘリウムの状態方程式

二 木 久 嗣

木星におけるヘリウムの存在度は水素に次いで大きく, 全質量の約 20% を占めると考えられている。従来の木星のモデルは, 水素-ヘリウム一様混合モデルが大部分であったが, 近年では, 水素-ヘリウムの分離により, コア中心にヘリウム層が存在する可能性もあ